数理解析研究所講究録
1040 巻 1998 年 143-153

二重指数関数型変換のすすめ

京都大学数理解析研究所　　森正武 (Masatake MORI)

1．数値積分と二重指数関数型変換

二重指数関数型変換は，

$$I=\int_{-1}^{1}\frac{dx}{(2-x)(1-x)^{1/4}(1+x)^{3/4}} \tag{1.1}$$

のように端点に特異性のある解析関数の積分を効率よく数値積分するために高橋・森によって 1974 年に提案された [31, 8, 10, 11].

この変換に基づく二重指数関数型数値積分公式は次のようにして導くことができる．対象とする積分を

$$I=\int_{a}^{b}f(x)dx \tag{1.2}$$

とする．積分区間 (a,b) は有限区間でも，半無限区間でも，また全無限区間でもよい．ここで，被積分関数 $f(x)$ は区間 (a,b) でつねに解析的でなければならないが，端点 $x=a$ または $x=b$ において特異性をもっていてもよい．

この積分 (1.2) に対して解析関数 $\phi(t)$ による変数変換

$$x=\phi(t),\quad a=\phi(-\infty),\ b=\phi(\infty) \tag{1.3}$$

を行うと，

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}f(\phi(t))\phi'(t)dt \tag{1.4}$$

となる．ここで，変換の関数 $\phi(t)$ は変換後の被積分関数の減衰が二重指数関数型になるように，すなわち

$$|f(\phi(t))\phi'(t)|\approx\exp(-c\exp|t|),\quad |t|\to\infty \tag{1.5}$$

を満たすように選ぶことが重要である．一方，(1.4) のような無限区間における解析関数の積分には等間隔刻み幅 h の台形公式が最適であることが知られている[1] [29]．そこで，(1.4) に台形公式を適用すると，

$$I_h=h\sum_{k=-\infty}^{\infty}f(\phi(kh))\phi'(kh) \tag{1.6}$$

[1]台形公式の最適性は，周期的解析関数の 1 周期にわたる積分についても成立する [6].

を得る．この無限和の上下限を $k=-N_-$，$k=N_+$ で打ち切ると，次のような積分公式が導かれる．

$$I_h^{(N)} = h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\phi(kh))\phi'(kh), \quad N = N_+ + N_- + 1 \tag{1.7}$$

N は関数計算回数である．無限和の打切りは，それによる打切り誤差 $|I_h - I_h^{(N)}|$ が台形公式による離散化誤差 $|I - I_h|$ とほぼ等しくなるように行う必要がある．

高橋・森は，変換後の被積分関数が (1.5) のように二重指数関数的に減衰するように構成した公式は，計算回数 N が大きくなるとき誤差が最も速く 0 に近づくという意味で，最適公式であることを示した [31]．このようにして得られた数値積分公式を二重指数関数型数値積分公式（double exponential formula，略して DE 公式）とよび，またこのような変換を二重指数関数型変換とよぶ．

区間 $(-1,1)$ における積分

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)dx \tag{1.8}$$

の場合，

$$x = \phi(t) = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right) \tag{1.9}$$

が二重指数関数型公式

$$I_h^{(N)} = h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f\left(\left(\frac{\pi}{2}\sinh kh\right)\right) \frac{\frac{\pi}{2}\cosh kh}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sinh kh\right)} \tag{1.10}$$

を与える．

二重指数関数型公式の典型的な特徴を挙げておく．

まず，(1.7) の誤差を関数計算回数 N の関数として表すと，

$$|\Delta I_h^{(N)}| = |I - I_h^{(N)}| \simeq \exp\left(-c_1 \frac{N}{\log N}\right) \tag{1.11}$$

となる．これは，関数計算回数 N を大きくするとき誤差がきわめて速く 0 に収束することを示している．なお，$(a,b)=(-1,1)$ の場合，(1.2) に対して一重指数関数型変換，例えば

$$x = \tanh t \tag{1.12}$$

を行うと，誤差は

$$|\Delta I_h^{(N)}| \approx \exp\left(-c_2\sqrt{N}\right) \tag{1.13}$$

のようになる．二重指数関数型公式は，上述したように，関数計算回数 N が大きくなるとき誤差が最も速く 0 に近づくようにデザインしてある．それに対応して，N が大きくなるとき (1.11) の方が (1.13) よりもずっと速く 0 に近づく．例えば (1.1) の場合，$N=50$ 程度

の関数計算回数で，(1.9) によれば 約 16 桁正しい値が得られるが，(1.12) では約 3 桁程度しか正しい値が得られない．

次に，端点に (1.1) のように特異性があっても，積分の計算はたいていの場合問題なく実行できる．これは，変換によって特異点が無限遠点に移り，結果として被積分関数が二重指数関数的に減衰するからである．また，端点での特異性の強さによらずに単一の公式 (1.7) で積分を計算できる．その意味で二重指数関数型公式は端点の特異性に強いといえる．

最後に，台形公式の刻み幅を変えたとき前のステップの計算値が利用できるので，この公式は自動積分プログラム向きであることが挙げられる．標本点と重みの計算も容易である．

二重指数関数型変換は，端点に特異性のある積分だけでなく，端点に特異性のないおとなしい解析関数の積分，半無限区間の積分 [9]，収束の遅い全無限区間の積分など，さまざまな積分に対して有効である．次に，いろいろな型の積分と，それにふさわしい二重指数関数型変換をまとめておく．

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)dx \quad \Rightarrow \quad x = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right), \tag{1.14}$$

$$I = \int_{0}^{\infty} f(x)dx \quad \Rightarrow \quad x = \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right), \tag{1.15}$$

$$I = \int_{0}^{\infty} f_1(x)\exp(-x)dx \quad \Rightarrow \quad x = \exp(t - \exp(-t)), \tag{1.16}$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx \quad \Rightarrow \quad x = \sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right). \tag{1.17}$$

歴史的には，二重指数関数型公式が発表されるより以前に，やはり変数変換に基づく公式として伊理・森口・高澤による IMT 公式が知られていた [2, 3, 29]．この公式は，有限区間 $(-1,1)$ を同じ区間 $(-1,1)$ に写像する変換に基づいて構成される公式で，いわば二重指数関数型公式の研究の発端になったものである [29, 30]．ただし，IMT 公式の誤差は $\exp(-c\sqrt{N})$ で表され，一重指数関数型変換によって導かれる公式の誤差と同様の挙動を示す．その後，IMT 公式についても二重指数関数型への改良の努力がなされた [12, 7]．

また杉原は，関数解析的議論を行うことにより，二重指数関数型公式の最適性をより数学的な形で証明している [26, 27]．数値積分の変数変換に基づく数学的議論は，Stenger の著書 [25] に詳しいが，Stenger は，$\int_{-\infty}^{\infty} g(w)dw$ を複素 w-平面上の実軸 $(-\infty,\infty)$ における積分と考え，被積分関数 $g(w)$ が w-平面上の帯状領域 $|\mathrm{Im}\,w| < d$ で正則であると仮定して議論を進めた．そして，二三の付加条件の下で，実軸上で $w \to \pm\infty$ のとき一重指数関数的減衰をする関数の $(-\infty,\infty)$ における積分には等間隔刻み幅の台形公式が最適公式であることを証明した．しかし，そのときの誤差の挙動は (1.13) のようになる．それに対して杉原は，やはり $|\mathrm{Im}\,w| < d$ における正則性の仮定の下で，二重指数関数的減衰をする関数の $(-\infty,\infty)$ における積分にもやはり台形公式が最適であることを証明した．そして，その誤差の挙動が (1.11) のようになることを明らかにし，二重指数関数型変換による方がより効率の高い公式が導かれることを示した．さらに杉原は，$|\mathrm{Im}\,w| < d$ で正則でしかも $\exp(-\exp(\frac{\pi}{2d}|w|))$ よ

りも速く減衰するような関数は存在しないことを証明し，結論として，二重指数関数型数値積分公式が最適であることを示した．

2．Fourier 型積分の計算

先に述べたように，二重指数関数型変換は広い範囲の積分に対して有効であるが，次のような振動する減衰の遅い関数の Fourier 型積分に対しては精度の良い結果を与えない．

$$\begin{cases} I_s = \int_0^\infty f_1(x)\sin\omega x dx, \\ I_c = \int_0^\infty f_1(x)\cos\omega x dx. \end{cases} \tag{2.1}$$

このような場合には，

$$\phi(-\infty)=0,\quad \phi(+\infty)=\infty \tag{2.2}$$

を満たし，かつ

$$t\to-\infty \text{ のとき二重指数関数的に } \phi'(t)\ \to 0 \tag{2.3}$$

および

$$t\to+\infty \text{ のとき二重指数関数的に } \phi(t)\ \to t \tag{2.4}$$

を満たす関数 $\phi(t)$ を使って

$$\begin{cases} I_s:\ \ x = M\phi(t)/\omega, \\ I_c:\ \ x = M\phi\left(t-\dfrac{\pi}{2M}\right)/\omega \end{cases} \qquad (M=\text{const.}) \tag{2.5}$$

なる変換を行えば，有効な二重指数関数型積分公式が導かれることを，1990 年に大浦・森が示した [18]．M は後で述べるように定める，ある定数である．この変換の目的は，x が正で大きくなるとき，公式の分点を $\sin\omega x$ あるいは $\cos\omega x$ の零点に二重指数関数的に近づけて，結果として大きな x については関数値を計算しないで済むようにすることにある．

この条件を満たす一つの具体的な関数として，大浦・森は最初

$$\phi(t)=\frac{t}{1-\exp(-k\sinh t)},\quad k=6 \tag{2.6}$$

を提案したが [18]，その後より有効な変換として

$$\phi(t)=\frac{t}{1-\exp(-2t-\alpha(1-e^{-t})-\beta(e^t-1))}, \tag{2.7}$$

$$\beta=1/4,\quad \alpha=\beta/\sqrt{1+M\log(1+M)/(4\pi)} \tag{2.8}$$

を提案した [21, 23, 24].

この変換を (2.1) の I_s に適用すると,

$$I_s = M\int_{-\infty}^{\infty} f_1(M\phi(t)/\omega)\sin(M\phi(t))\phi'(t)/\omega dt \tag{2.9}$$

が得られるが，これに刻み幅 h の台形公式を適用すると,

$$I_{s,h}^{(N)} = Mh\sum_{k=-N_-}^{N_+} f_1(M\phi(kh)/\omega)\sin(M\phi(kh))\phi'(kh)/\omega \tag{2.10}$$

を得る．I_c の場合も同様である．ここで，M と h は

$$Mh = \pi \tag{2.11}$$

なる関係を満たすように選ぶ．このように選ぶと，I_c の場合も含めて

$$\begin{cases} \sin(M\phi(kh)) \sim \sin Mkh = \sin \pi k = 0 \\ \cos\left(M\phi\left(kh - \dfrac{\pi}{2M}\right)\right) \sim \cos\left(Mkh - \dfrac{\pi}{2}\right) = \cos\left(\pi k - \dfrac{\pi}{2}\right) = 0 \end{cases} \tag{2.12}$$

が成り立ち，k が正で大きくなるとき確かに分点が $\sin\omega x$ あるいは $\cos\omega x$ の零点に二重指数関数的に近づいていくことがわかる．

この公式は，例えば

$$I = \int_0^{\infty} \log x \sin x dx = -\gamma \tag{2.13}$$

のように，被積分関数に発散する関数 $\log x$ を含むような場合にも有効である [18, 20]．こ

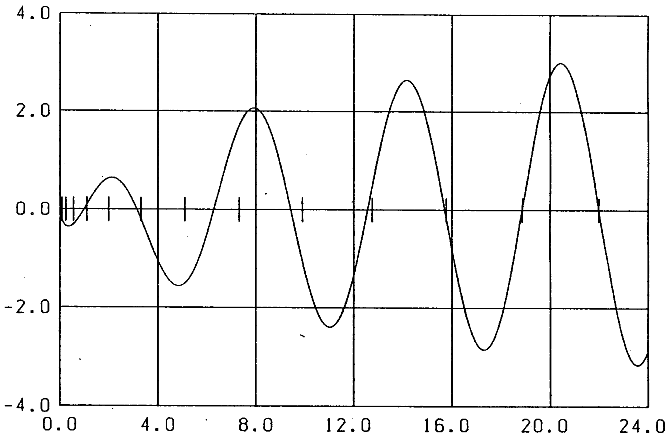

図 1: $\log x \sin x$ と公式の分点

の積分は本来

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0}\int_0^{\infty} \exp(-\varepsilon x)\log x \sin x dx = -\gamma \tag{2.14}$$

として定義されるものであるが，公式 (2.10) に単に $f_1(x) = \log x$ の値を 70 点程度与えるだけで約 15 桁が正しい $-\gamma$ の近似値が得られる．図 1 に，被積分関数 $\log x \sin x$ の挙動と，公式の分点の位置を示した．x が正で大きい部分では公式の分点が $\sin x$ の零点に近づいていることがわかる．

3．二重指数関数型変換のその他の型の積分への応用

二重指数関数型変換は，この他にも数値積分に関係していろいろな形で応用されている．

緒方・杉原・森は Cauchy の主値

$$I = \mathrm{p.v.}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{x-\lambda}dx \tag{3.1}$$

と Hadamard の有限部分積分

$$I = \mathrm{f.p.}\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{(x-\lambda)^n}dx \tag{3.2}$$

の計算に二重指数関数型変換を利用する方法を提案した [13]．

また緒方・杉原は，Bessel 関数を含む積分，例えば

$$I = \int_0^\infty \frac{x}{x^2+1}J_0(x)dx \tag{3.3}$$

に対して，[18] と同様な考えに基づく計算法を提案した [14, 15, 16]．なお，緒方・杉原は，Bessel 関数の零点を標本点とする補間型積分公式の研究の過程で，反対称積分，すなわち

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{sign}\, x f(x)dx = \left(\int_0^\infty - \int_{-\infty}^0\right) f(x)dx \tag{3.4}$$

の型の積分に対して，きわめて精度の高い結果を与える補間型数値積分公式を発見した [16]．

大浦は，Euler 変換のある種の連続化を提案し，それと二重指数関数型変換を結び付け，減衰の遅い一般の振動型積分の値を被積分関数の零点の分布に無関係に計算できる方法を提案した [19, 22, 23]．この方法によれば

$$I = \int_0^\infty J_0(\sqrt{2x+x^2})dx \tag{3.5}$$

のような積分も効率良く計算することができる．

4．Sinc 関数近似と二重指数関数型変換

二重指数関数型変換の有効性は，数値積分だけでなく，Sinc 関数に基づく関数近似や微分方程式の数値解においても見られる．いずれの場合にも，数値積分の場合と同様，最終的

には区間 $(-\infty,\infty)$ における近似が対象になる．そして，そこでの近似で基底関数として使用される Sinc 関数は次の形で定義される関数である．

$$S(k,h)(x)=\frac{\sin\frac{\pi}{h}(x-kh)}{\frac{\pi}{h}(x-kh)},\quad k=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{4.1}$$

h を定めると関数系が定まり，番号 k ごとに一つの基底関数が対応する．図 2 に $h=1$ の場合の Sinc 関数を示した．

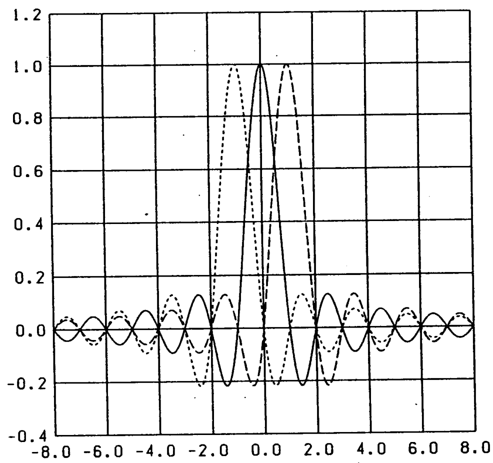

図 2: $h=1$ の Sinc 関数．左から $S(-1,h)$，$S(0,h)$，$S(1,h)$．

関数系 $S(k,h)(x)$, $k=0,\pm1,\pm2,\cdots$ によって

$$f_N(x)=\sum_{k=-n}^{n} f(kh)S(k,h)(x),\quad N=2n+1 \tag{4.2}$$

の形で表される近似を，Sinc 関数近似という．

Sinc 関数近似と台形公式の間には

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{k=-n}^{n} f(kh)S(k,h)(x)dx=h\sum_{k=-n}^{n} f(kh) \tag{4.3}$$

なる関係が成り立っており，この関係が Sinc 関数近似と数値積分とを結び付けている．

数値解析における Sinc 関数の重要性はすでに 1974 年に高橋 [32] が指摘し，その中で近似の収束を速くする方法も提案されている．その後日本では関数近似の手段として Sinc 近似が取り上げられることはほとんどなかったが，最近杉原が再び Sinc 近似の有用性を指摘し [28]，日本でもやっと研究が始まっている．

Sinc 関数については [25] に詳細な数学的議論がなされている．Sinc 近似は区間 $(-\infty,\infty)$ における近似であるので，実際問題では $\pm\infty$ における関数の減衰が重要になるが，[25] の中で展開されている議論はすべて一重指数関数型の減衰が基本になっている．それに対して，

杉原は，Sinc 関数近似の場合にも，数値積分の場合と同様の意味で，二重指数関数型の減衰が最適性を実現することを証明した [28].

堀内・杉原は，Sinc 関数近似と二重指数関数型変換を使って常微分方程式の境界値問題の Sinc-Galerkin 法による近似解に関する解析を行った [1]. 与えられた方程式を

$$\begin{cases} \tilde{y}''(x) + \tilde{\mu}(x)\tilde{y}'(x) + \tilde{\nu}(x)\tilde{y} = \tilde{\sigma}(x), & a < x < b \\ \tilde{y}(a) = \tilde{y}(b) = 0 \end{cases} \tag{4.4}$$

とする．この方程式に対して，変数変換

$$x = \phi(t), \quad a = \phi(-\infty),\ b = \phi(\infty) \tag{4.5}$$

を行って問題の定義区間を $(-\infty, \infty)$ に変換する．このとき，

$$y(t) = \tilde{y}(\phi(t)) \tag{4.6}$$

とおくと，(4.4) は次のように変換される．

$$\begin{cases} y''(t) + \mu(t)y'(t) + \nu(t)y(t) = \sigma(t), & -\infty < t < \infty \\ y(-\infty) = y(\infty) = 0 \end{cases} \tag{4.7}$$

ここで，

$$y_N(t) = \sum_{k=-n}^{n} w_k S(k,h)(t), \quad N = 2n+1 \tag{4.8}$$

とおいて Sinc-Galerkin 法を適用する．

まず，変換後に解の関数 $y(t)$ が

$$|y(t)| \leq \alpha \exp(-\beta|t|) \tag{4.9}$$

のように一重指数関数的に減衰することが仮定できるならば，近似の誤差は

$$|y(t) - y_N(t)| \leq c' N^{\frac{5}{2}} \exp\left(-c\sqrt{N}\right) \tag{4.10}$$

となることが理論と数値実験の両方で示される．一方，変換後に解の関数 $y(t)$ が

$$|y(t)| \leq \alpha \exp\left(-\beta \exp(\gamma|t|)\right) \tag{4.11}$$

のように二重指数関数的に減衰することが仮定できるならば，近似の誤差は

$$|y(t) - y_N(t)| \leq c' N^2 \exp\left(-\frac{cN}{\log N}\right) \tag{4.12}$$

となることが示される．(4.12) と (4.10) を比較すれば明かなように，二重指数関数型変換の方がずっと速い収束を与える．この (4.12) が誤差の最適の減衰の仕方であることは厳密な

定理の形で証明されているわけではないが，単純な Sinc 関数近似のときの最適性からの類推で，おそらくは何らかの形で最適性が表現できるであろうと予想される．

腰原・杉原は，Sinc-Collocation 法を Sturm-Liouville 型固有値問題に適用し，二重指数関数型変換によって固有値が (4.12) と同様の挙動を示すことを，やはり理論および数値実験の両方で示した [4].

松尾は，非線形 Schrödinger 方程式の数値解を pseudospectral 法で求めるために二重指数型変換に基づく Sinc 関数近似を採用して，良い近似解が得られることを示した [5].

以上述べてきたように，二重指数関数型変換は数値解析のいろいろなところで効率の良い変換として役立っている．この変換が広い分野でより一層活用されることを期待したい．

参考文献

[1] 堀内賢一，杉原正顕，二重指数関数型変換を用いた 2 点境界値問題の数値解法 — 二重指数関数型変換を用いた Sinc-Galerkin 法 —，日本応用数理学会平成 8 年度年会予稿集 142–143.

[2] 伊理正夫，森口繁一，高澤嘉光，ある数値積分公式について，京都大学数理解析研究所講究録 No.91 (1970) 82–119.

[3] M. Iri, S. Moriguti and Y. Takasawa, On a certain quadrature formula, *J. Comput. Appl. Math.* **17** (1987) 3–20 （[2] の英訳）.

[4] 腰原敬弘，杉原正顕，二重指数関数型変数変換を用いた Sturm-Liouville 固有値問題の数値解法，日本応用数理学会平成 8 年度年会予稿集 136–137.

[5] 松尾宇泰，Sinc 型 Pseudospectral 法への DE 変換の適用について，日本応用数理学会平成 9 年度年会予稿集 36–37.

[6] M. Mori, On the superiority of the trapezoidal rule for the integration of periodic analytic functions, *Memoirs of Numerical Mathematics* No.1 (1974) 11–19.

[7] M. Mori, An IMT-type double exponential formula for numerical integration, *Publ. RIMS. Kyoto Univ.* **14** (1978) 713–729.

[8] M. Mori, Quadrature formulas obtained by variable transformation and the DE-rule, *J. Comput. Appl. Math.* **12** & **13** (1985) 119–130.

[9] M. Mori, The double exponential formula for numerical integration over the half infinite interval, *Numerical Mathematics Singapore 1988*, International Series of Numerical Mathematics **86** (1988) 367–379 (Birkhäuser).

[10] M. Mori, An error analysis of quadrature formulas obtained by variable transformation, ***Algebraic Analysis***, Vol.1, ed. M. Kashiwara and T. Kawai, 1988, 423–437 (Academic Press).

[11] M. Mori, Developments in the double exponential formulas for numerical integration, ***Proceedings of the International Congress of Mathematicians Kyoto 1990***, 1585–1594 (Springer-Verlag, Tokyo, 1991).

[12] K. Murota and M. Iri, Parameter tuning and repeated application of the IMT-type transformation in numerical quadrature, *Numer. Math.* **38** (1982) 347–363.

[13] 緒方秀教，杉原正顕，森正武，Cauchy の主値及び Hadamard の有限部分積分に対する DE 公式，日本応用数理学会論文誌 **3** (1993) 309–322.

[14] 緒方秀教，杉原正顕，実数次 Bessel 関数の零点を標本点にもつ数値積分公式，日本応用数理学会平成 7 年度年会予稿集 6–7.

[15] 緒方秀教，杉原正顕，Bessel 関数の零点を標本点に持つ数値積分公式 — 正確な値を与える場合と最適性，京都大学数理解析研究所講究録 No.944 (1996) 87–95.

[16] 緒方秀教，杉原正顕，Bessel 関数の零点を標本点にもつ補間および数値積分公式，日本応用数理学会論文誌 **6** (1996) 39–66.

[17] 緒方秀教，大浦拓哉，振動積分に対する DE 型数値積分公式の理論誤差解析，日本応用数理学会平成 8 年度年会予稿集 18–19.

[18] T. Ooura and M. Mori, The double exponential formula for oscillatory functions over the half infinite interval, *J. Comput. Appl. Math.* **38** (1991) 353–360.

[19] 大浦拓哉，Euler 変換のある拡張について，日本応用数理学会平成 5 年度年会予稿集 111–112.

[20] T. Ooura and M. Mori, Double exponential formula for Fourier type integrals with a divergent integrand, ***Contributions in Numerical Mathematics***, World Scientific Series in Applicable Analysis **2** (1993) 301–308.

[21] 大浦拓哉，フーリエ変換型積分に対する新しい変数変換の試み，日本応用数理学会平成 6 年度年会予稿集 260–261.

[22] 大浦拓哉，連続版 Euler 変換に DE 変換を用いた振動型無限積分の計算法，日本応用数理学会平成 8 年度年会予稿集 22–23.

[23] 大浦拓哉，Fourier 型積分に対する数値積分法の研究，東京大学大学院工学系研究科博士論文，1997 年.

[24] T. Ooura and M. Mori, A robust double exponential formula for Fourier type integrals, submitted for publication in *J. Comput. Appl. Math.*

[25] F. Stenger, ***Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions*** (Springer-Verlag, New York, 1993).

[26] 杉原正顕，DE 変換公式の最適性について，京都大学数理解析研究所講究録 No.585 (1986) 150–175.

[27] M. Sugihara, Optimality of the double exponential formula — functional analysis approach —, *Numer.Math.* **75** (1997) 379–395.

[28] 杉原正顕，二重指数関数型変換を用いた Sinc 関数近似，京都大学数理解析研究所講究録 No.990 (1997) 125–134.

[29] H. Takahasi and M. Mori, Error estimation in the numerical integration of analytic functions, *Report Comput. Centre, Univ. Tokyo* **3** (1970) 41–108.

[30] H. Takahasi and M. Mori, Quadrature formulas obtained by variable transformation, *Numer. Math.* **21** (1973) 206–219.

[31] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, *Publ. RIMS Kyoto Univ.* **9** (1974) 721–741.

[32] 高橋秀俊，複素関数論と数値解析，京都大学数理解析研究所講究録 No.253「数値解析とコンピュータ」(1975) 24–37.